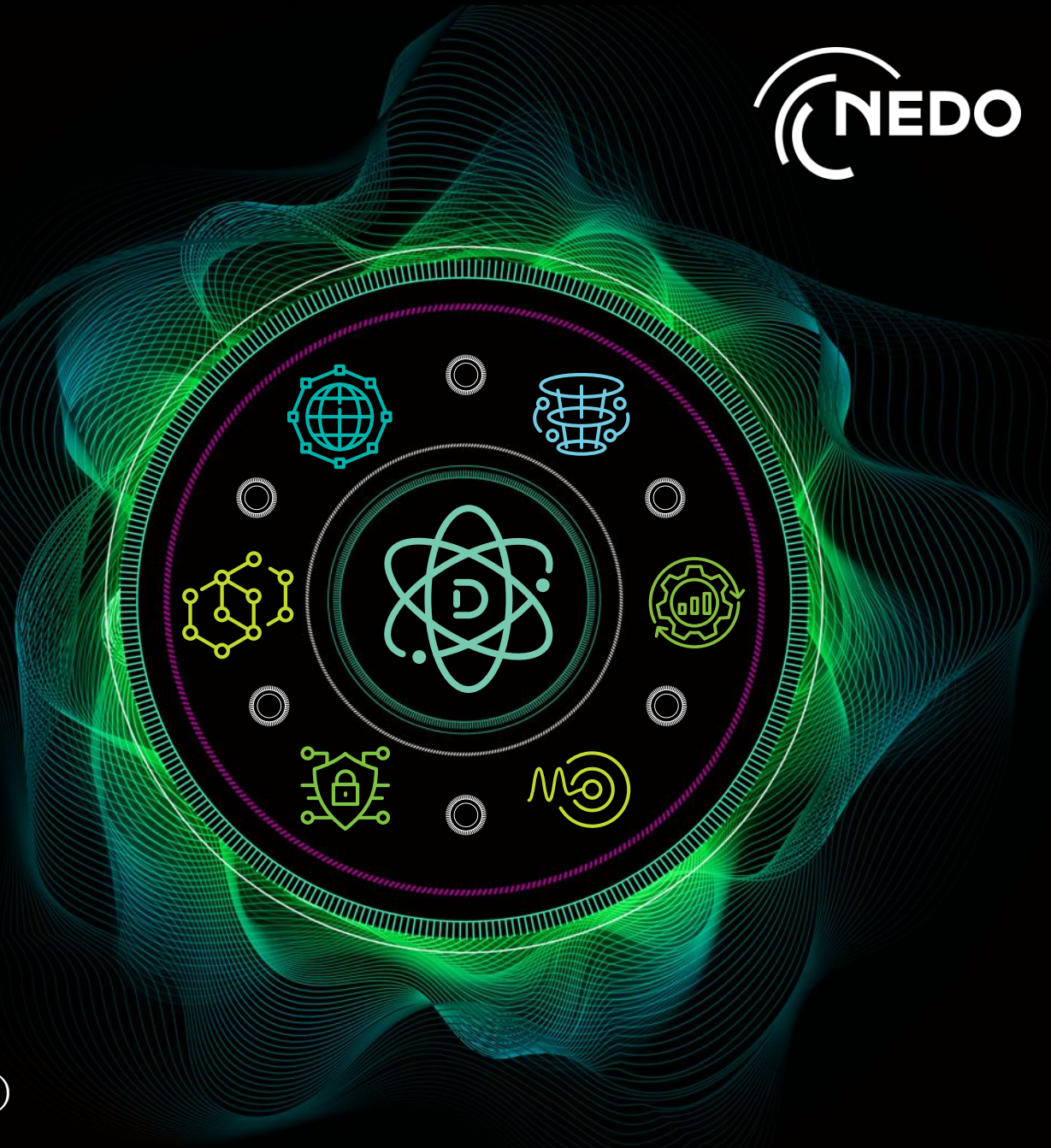
量子コンピューティング ユースケース集

アンモニア合成の効率化に向けた窒素固定反応シミュレーション

Microsoft Research·チューリッヒ工科大



国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）

Microsoft Research・チューリッヒ工科大：アンモニア合成の効率化に向けた窒素固定反応シミュレーション　【2017/07】　1／3

構想

産業領域	エネルギー
プロセス	燃料合成
手法	シミュレーション
技術分類	ゲート*

取組の背景

- グローバルな取組である気候変動対策において、**化石燃料の代替候補のクリーン燃料としてアンモニアが注目**されている
  - ✓ 燃焼時にCO2を排出しないことで脱炭素化に貢献
- 一方で、**アンモニアの製造法は大量のエネルギー消費とCO2の排出をしている**
  - ✓ 現在主流の製造法である「**ハーバーボッシュ法**」は、**高温高圧条件の合成法（400～600℃の高い温度と100～300気圧の高圧力）**
  - ✓ **地球全体で消費されるエネルギーの1～2%を要し、製造時に排出されるCO2の量も、人類の排出量の1～3%を占有**
- 「ハーバーボッシュ法」を代替するための、環境にやさしい－低消費エネルギー・低CO2排出－アンモニア製造の代替法のニーズがある

解決したい課題・モチベーション

- 「ハーバーボッシュ法」では**空気中の窒素を固定するプロセスにエネルギーの大部分が消費**されているが、自然界、特に**生物系ではマメ科の植物の根に存在する窒素固定酵素（ニトロゲナーゼ）に常温・常圧でアンモニアの合成を促す働き**がある
  - ✓ その仕組みは**FeMocoと呼ばれる補因子*が関与**
    *酵素の触媒活性に必要なタンパク質以外の化学物質
- 生物系と同様の反応を工業的に実現することでクリーンなアンモニア製造が実現できるが、**FeMocoが関与する化学反応が複雑で量子性が強いため、古典コンピューター（スパコン）ではシミュレーションが困難**
  - ✓ ニトロゲナーゼ酵素中の**FeMoco補因子は遷移金属触媒としてアンモニア合成に関与**するが、**電子間相互作用が強く、**古典コンピューターで多用される**近似法のHartree-FockやDFTでは正確な化学反応が捉えられない**
- 現在、量子コンピューターで量子化学計算に対して量子加速を持つアルゴリズムを活用した分子シミュレーションが研究されている

参考：東京大学「世界で初めて窒素ガスと水からのアンモニア合成に成功 ～常温常圧で世界最高の触媒活性、持続可能な社会へ～」（https://www.t.u-tokyo.ac.jp/hubfs/shared-old/press/data/setnws_20190425105724638383038O_077019.pdf）、科学技術・学術政策研究所「大阪大学大学院 基礎工学研究科 システム創成専攻電子光科学領域 教授 藤井 啓祐 氏インタビュー　－万能量子コンピューター実現を目指した、量子ソフトウェアの研究開発で量子情報科学分野を先導－」（https://www.nistep.go.jp/activities/sti-horizon%E8%AA%8C/vol-07no-04/stih00273）
*ゲート（gate-based）＝ 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

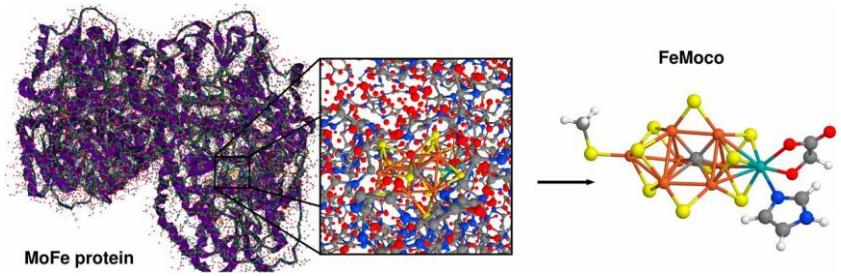
Microsoft Research・チューリッヒ工科大：アンモニア合成の効率化に向けた窒素固定反応シミュレーション　【2017/07】　2／3

構想

産業領域　エネルギー
プロセス　燃料合成
手法　シミュレーション
技術分類　ゲート*

量子コンピューターとしての問題設定

- **電子相関を考慮**し、より多くの軌道数を含む計算が可能な密度行列繰り込み群とCASSCF（多配置自己無撞着場）法を組合せ、**量子位相推定を用いた量子コンピューター計算を実行**した
- **量子コンピューターとして、2つの条件で計算**
  - ✓ **短中期で実現可能なFTQCで計算可能なエラー率、10-3、ゲート速度 100 ns**
  - ✓ **将来実現可能なFTQCで計算可能なエラー率、10-6、ゲート速度 10 ns**



ニトロゲナーゼ酵素（左図）の活性中心にある鉄・モリブデン補因子（FeMoco）（右図）により、窒素ガスのアンモニアへの変換反応を起こす

参考：PNAS「Elucidating reaction mechanisms on quantum computers」（https://www.pnas.org/doi/10.1073/pnas.1619152114）
*ゲート（gate-based）＝ 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

Microsoft Research・チューリッヒ工科大：アンモニア合成の効率化に向けた窒素固定反応シミュレーション 【2017/07】 3／3

構想

産業領域 エネルギー
プロセス 燃料合成
手法 シミュレーション
技術分類 ゲート*

期待されるビジネス効果

- **FeMocoが関与する化学反応が複雑で量子性が強いことにより、古典コンピューターでは計算が困難であるが、量子コンピューターによる2つの条件でのシミュレーションに必要な計算リソースと時間を算出**した
  - ✓ 許容誤差を厳密解から0.1 mHartree*1以内に収めるには、Serial（シングルスレッド）ではStructure1、2とも論理量子ビット数が111で3年以上が必要
  - ✓ 一方、PAR（マルチスレッド）では両者とも論理量子ビット数2000程度で1.5か月～3か月で実行
- 窒素ゲナーゼ中の生物学的窒素固定という**未解決の問題を例に、量子コンピューターを用いて複雑な化学系における反応機構を解明できる**ことを示した

Table 1. Simulation time estimates

Structure	T gates	Cl. gates	Δt (10 ns)	Δt (100 ns)	Qubits
Quantitatively accurate simulation (0.1 mHa)					
Structure 1					
Serial	1.1×10^{15}	1.7×10^{15}	130 d	3.6 y	111
Nesting	3.5×10^{15}	5.7×10^{15}	15 d	4.9 mo	135
PAR	3.1×10^{16}	3.1×10^{16}	110 h	1.5 mo	1,982
Structure 2					
Serial	2.0×10^{15}	3.1×10^{15}	240 d	6.6 y	117
Nesting	6.5×10^{15}	1.0×10^{16}	27 d	8.9 mo	142
PAR	6.0×10^{16}	6.0×10^{16}	210 h	2.9 mo	2,024
Qualitatively accurate simulation (1 mHa)					
Structure 1					
Serial	1.0×10^{14}	1.6×10^{14}	12 d	3.9 mo	111
Nesting	3.3×10^{14}	5.6×10^{14}	1.4 d	14 d	135
PAR	3.0×10^{15}	3.0×10^{15}	11 h	4.6 d	1,982
Structure 2					
Serial	1.9×10^{14}	3.0×10^{14}	22 d	7.2 mo	117
Nesting	6.0×10^{14}	9.9×10^{14}	2.5 d	25 d	142
PAR	5.5×10^{15}	5.5×10^{15}	20 h	8.3 d	2,024

Listed are the number of Clifford and T-gate operations, the estimate of the run time (Δt), and the number of logical qubits required to obtain energies within 0.1 mHa or 1 mHa for two different structures of FeMoco on a quantum computer. Structure 1 is for spin state $S = 0$ and charge $+3$ elementary charges with 54 electrons in 54 spatial orbitals. Structure 2 is for spin state $S = 1/2$ and charge 0 with 65 electrons in 57 spatial orbitals (see *SI Appendix* for further details). These run times and gate counts are likely to be pessimistic.

参考：PNAS「Elucidating reaction mechanisms on quantum computers」（https://www.pnas.org/doi/10.1073/pnas.1619152114）
*ゲート（gate-based） = 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

WEBサイトにて、その他の事例も公開しています。ぜひご覧ください。
https://www.quantum-computing-use-cases.nedo.go.jp

他の事例を見る

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）
AI・ロボット部（e-mail：quantum_ai@ml.nedo.go.jp）

本ユースケース集は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術開発機構（NEDO）の委託業務「量子・古典ハイブリッド技術のサイバー・フィジカル開発事業／量子技術に関するユースケース事例調査」および「ポスト５Ｇ情報通信システム基盤強化研究開発事業（量子産業化）／量子コンピュータの産業化促進に向けた包括的調査」の成果として、得られたものです。